

которых можно представить примерный объёмный образ параболической ванны расплава, а также восстановить поверхностную ширину треков: 160–200 мкм.

Средствами пакетов Digimat и Ansys проведён расчёт температурного поля, реализуемого в процессе 3D печати. Аппроксимация по времени производится путём разбиения на квазистационарные шаги [1]. Общее уравнение баланса энергии на каждом этапе можно записать в виде [2]:

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + \dot{q}, \quad (1)$$

где  $\rho$  – плотность,  $C$  – удельная теплоемкость,  $k$  – теплопроводность,  $v$  – скорость, а  $\dot{q}$  представляет собой мощность источника тепла.

Модель облучения получена из совмещения цилиндрического и гауссового распределения энергии ЛИ [3].

$$\bar{q} = (1 - e^{-2}) \alpha \frac{P}{\pi R^2} = 0.864 \alpha \times q_{cyl}, \quad (2)$$

где  $P$  – мощность лазера,  $R$  – радиус пучка.

Результаты моделирования согласуются с экспериментом, а также дают следующую дополнительную информацию о процессе: *температурный градиент смещается в сторону сплошного материала*, проплавление порошка около 55 мкм, влияние стальной платформы построения нивелируется первым слоем порошка в 40 мкм.

1. Gusarov A.V., Phys. Rev. B., 77, 144-201 (2008).
2. Childs T. H., Proceedings from the Institute of Mechanical Engineers, 10, 339–357 (2005).
3. Crafer R. C. Laser processing in manufacturing / Crafer, R. C. and Oakley, P. J., Chapman & Hall 10, 195–200 (1993).

## CHARACTERIZATION OF TiO<sub>x</sub> BARRIER LAYERS IN ORGANIC SOLAR CELLS: XPS AND DFT STUDIES

Zhidkov I.S.<sup>1</sup>, Kurmaev E.Z.<sup>1,2</sup>, Korotin M.A.<sup>2</sup>, Kukhareenko A.I.<sup>1\*</sup>, Achilleas S.<sup>3</sup>, Choulis S.A.<sup>3</sup>, Korotin D.M.<sup>1,2</sup>, Cholak S.O.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

<sup>2</sup>) Institute of Metal Physics, Russian Academy of Sciences – Ural Division, Yekaterinburg, Russia

<sup>3</sup>) Cyprus University of Technology, 3603 Limassol, Cyprus

\*E-mail: [a.i.kukhareenko@urfu.ru](mailto:a.i.kukhareenko@urfu.ru)

The results of XPS measurements (core levels and valence bands) of ITO/TiO<sub>x</sub> thin films prepared from titanium butoxide (C<sub>16</sub>H<sub>36</sub>O<sub>4</sub>Ti) diluted in isopropanol which are used in organic photovoltaics device (ITO/TiO<sub>x</sub>/P3HT:PCBM/PEDOT:PSS/Ag) are presented. XPS Ti 2p and valence band spectra show the presence of additional

features which are absent in spectra of titanium butoxide deposited on Si and are attributed to appearance of  $Ti^{3+}$  valence states in ITO/ $TiO_x$ . This conclusion is confirmed by density functional theory electronic structure calculations of stoichiometric  $TiO_2$  and oxygen deficient  $TiO_{2-1/8}$ . XPS C 1s measurements show the formation of C–O and O–C=O bonds which evidence the presence of residual carbon which can draw oxygen from the film network and induce the formation of fraction of  $Ti^{3+}$  states in  $TiO_x$  films. The formation of  $Ti^{3+}$  surface states in the band gaps can induce a reduction in the rate of recombination between electrons and holes, increase a photocatalytic activity and improve the photovoltaic properties.

To conclude, we have studied Ti oxidation states in ITO/ $TiO_x$  thin films prepared from titanium butoxide ( $Ti^{4+}$ ) diluted in isopropanol. The appearance of  $Ti^{3+}$  states in ITO/ $TiO_x$  is proved by the measurements of XPS Ti 2p and XPS VB spectra and DFT calculations of stoichiometric and oxygen deficient  $TiO_2$ . The measurements of XPS C 1s and O 1s spectra have shown the formation of C–O and O–C=O bonds which can draw of oxygen from the film network. By such way, the oxygen deficiency in  $TiO_x$  is created and as a result,  $Ti^{3+}$  surface states can induce a reduction in the rate of recombination between electrons and holes and improve the photovoltaic properties.

*This work was supported by RFBR grant 14-08-31088.*

## **ФОРМИРОВАНИЕ БИОСОВМЕСТИМОЙ ПОВЕРХНОСТИ ТИТАНОВЫХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ИОННОЙ ИМПЛАНТАЦИИ**

Кухаренко А. И.<sup>1\*</sup>, Жидков И.С.<sup>1</sup>, Коротин Д.М.<sup>1,2</sup>,  
Курмаев Э.З.<sup>2</sup>, Скорилов Н.А.<sup>2</sup>, Анохин Е.С.<sup>1</sup>, Чолах С.О.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России  
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2)</sup> Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН,  
г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: [a.i.kukharenko@urfu.ru](mailto:a.i.kukharenko@urfu.ru)

## **FORMATION BIOCOMPATIBLE SURFACE OF THE TITANIUM MATERIALS BY ION IMPLANTATION**

Kukharenko A.A.<sup>1</sup>, Zhidkov I.S.<sup>1</sup>, Korotin D.M.<sup>1,2</sup>,  
Kurmaev E.Z.<sup>2</sup>, Skorikov N.A.<sup>2</sup>, Anokhin E.S.<sup>1</sup>, Cholakh S.O.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

<sup>2)</sup> M.N. Miheev Institute of Metal Physics, Yekaterinburg, Russia

X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) is used to study the effect of implantation of phosphorus and calcium ions on the structure and electronic structure of the surface of the titanium samples. After ion implantation of  $P^+$  and / or  $Ca^+$  the structures are formed on the surface of the samples which has favorable effect on the biocompatibility.